



TITLE:

Construction of interatomic potentials using large sets of DFT calculations and linear regression method(Abstract_要旨)

AUTHOR(S):

Takahashi, Akira

CITATION:

Takahashi, Akira. Construction of interatomic potentials using large sets of DFT calculations and linear regression method. 京都大学, 2017, 博士(工学)

ISSUE DATE:

2017-03-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k20369>

RIGHT:

京都大学	博士（工学）	氏名	高橋 亮
論文題目	Construction of interatomic potentials using large sets of DFT calculations and linear regression method (網羅的第一原理計算と線形回帰を用いた原子間ポテンシャルの構築)		
(論文内容の要旨)			
<p>本論文は、網羅的な第一原理計算と線形回帰を用いた高精度原子間ポテンシャルの構築手法の提案、および同手法を用いた多様な単体金属の原子間ポテンシャルの構築とその精度を評価した結果についてまとめられており、5章から構成されている。</p>			
<p>第1章は序論である。従来の物理学的考察に基づいた原子間ポテンシャルの構築手法と、大規模第一原理計算と機械学習を用いた原子間ポテンシャルの構築手法について簡単にまとめている。また、機械学習を用いた原子間ポテンシャル構築手法の問題点として、ポテンシャル構築のためには結晶構造を記述子とよばれる情報に変換する必要があるが、その記述子の選び方が難しいことを指摘している。また、記述子の選択が難しい理由として、従来の機械学習を用いた原子間ポテンシャルには物理学的・数学的観点からの洞察がほとんどなされず、機械学習の手法を安直に適用していたため、現状では記述子による結晶構造の表現方法を研究者の勘や試行錯誤によって決めざるを得ないということを挙げている。</p>			
<p>第2章では、第1章で述べた問題を解決するために、数学的な考察から原子間ポテンシャルの一般形を導き、その一般形と従来の物理学的考察による原子間ポテンシャルの関数形との関係を明らかにすることを目的としている。まず、非磁性の単体金属における原子間ポテンシャルの関数形に要求される条件を示し、これを満たす一般的な関数形を獲得している。また、ニューラルネットワーク等の機械学習を用いた原子間ポテンシャルが、一般的な関数形を機械学習手法により求めることと等価になっていることを示している。さらに得られた式を多項式近似することにより線形回帰手法によるポテンシャル構築手法を導出し、得られた手法が以前提案されていた線形回帰ポテンシャル構築手法の拡張になっていることを示している。また、原子埋め込み法 (Embedded atom method, EAM)や改良 EAM 等の機械学習に依らない従来の原子間ポテンシャルは Carlsson により関数形の分類がなされているが、本研究において導出した原子間ポテンシャルの一般形および機械学習による原子間ポテンシャルの関数形はこれらの拡張形になっていることを示している。このことから、機械学習による原子間ポテンシャル構築手法が高精度であることの理由として、従来の原子間ポテンシャルに比べて単に参照するデータ数と関数に含まれる係数が多いことだけではなく、本質的に関数形が拡張されていることも挙げられると指摘している。</p>			
<p>第3章では、第2章で提案した拡張された線形回帰による原子間ポテンシャル構築手法を 31 種類の元素に応用している。まず、各元素について 2700 構造ずつ第一原理計算を行い、これらのエネルギーや原子に働く力を学習データとすることで原子間ポテンシャルを構築した。次に、学習データに含まれない未知の 300 構造のエネルギーや、弾性定数・フォノン分散関係といった物性値を評価し、第一原理計算による計算値や、</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	高橋 亮
<p>これまでに報告されている従来の線形回帰ポテンシャルによる予測値と比較している．拡張された線形回帰ポテンシャルは，従来の線形回帰ポテンシャルよりも，エネルギーの予測精度が大幅に向上している．さらに弾性定数やフォノン分散関係といった物性値についても，拡張された線形回帰ポテンシャルが精度よく予測できることを示している．元素別に見ると，とりわけ典型元素において第一原理計算をよく再現できており，遷移金属については従来の線形回帰ポテンシャルよりも予測精度が改善しているものの第一原理計算との不一致が大きい傾向が見られている．遷移金属におけるこのような不一致は結合角度情報の不足が原因であると指摘している．また，Al と Cu について，従来の EAM により予測された物性値との比較を行い，拡張された線形回帰ポテンシャルの方が精度よくエネルギー・弾性定数・フォノン分散図を予測できることを示している．</p> <p>第 4 章では，遷移金属における物性値予測精度の向上の為，3 体間角度の情報を含む角度フーリエ級数(Angular Fourier Series, AFS)を用いて，第 3 章と同様，31 種類の元素について原子間ポテンシャルを構築している．AFS を導入した結果，31 種類全ての元素について AFS を用いない場合に比べてエネルギー予測精度が大幅に向上することを示している．また，弾性定数やフォノン分散関係も AFS を導入しない場合に比べて，特に遷移金属で第一原理計算値との不一致が改善されることを示している．また，Ti について，従来の EAM や改良 EAM よりも弾性定数やフォノン分散関係を精度よく予測できることを示している．</p> <p>第 5 章は結論であり，本論文で得られた成果について要約している．</p>			

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、網羅的な第一原理計算と線形回帰を用いた高精度原子間ポテンシャルの構築手法の提案、および同手法を用いた 31 種類の単体金属の原子間ポテンシャルの構築とその精度を評価した結果についてまとめられており、主たる成果は次の通りである。

1. 非磁性の単体金属における原子間ポテンシャルの関数形に要求される条件を示し、これを満たす一般的な関数形を獲得した。さらに得られた式から線形回帰によるポテンシャル構築手法を導出し、これが従来の線形回帰ポテンシャル構築手法の拡張になっていることを示した。
2. 提案手法を 31 種類の元素に応用し、原子間ポテンシャルを構築した。拡張された線形回帰ポテンシャルは、これまでに報告されている様々な関数形によるものよりも、エネルギーの予測精度が大幅に向上していた。さらに弾性定数やフォノン分散関係を評価し、第一原理計算結果と比較した結果、とくに典型元素において第一原理計算をよく再現できることを示した。
3. 遷移金属における物性値予測精度の向上の為、3 体間角度の情報を含む角度フーリエ級数(Angular Fourier Series, AFS)を用いて原子間ポテンシャルを構築した。AFSを導入した結果、31 種類全ての元素について AFS を用いない場合に比べてエネルギー予測精度が向上することを示した。また、弾性定数やフォノン分散関係も AFSを導入しない場合に比べて、特に遷移金属で第一原理計算値との不一致が改善されることを示した。

以上、本論文は、原子間ポテンシャルの一般的な関数形を獲得し、更に多種の元素において網羅的な第一原理計算と線形回帰を用いた原子間ポテンシャル構築手法の高精度化に成功したものであり、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 29 年 2 月 20 日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。

要旨公開可能日： 平成 29 年 3 月 23 日以降